



TITLE:

表紙・目次ほか

AUTHOR(S):

CITATION:

表紙・目次ほか. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム
研究成果報告書 2020, 2019

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251082>

RIGHT:

スーパーコンピュータシステム

令和元年度

研究成果報告書



京都大学化学研究所

はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992 年 1 月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2020 年 1 月に導入されたシステムは、ゲノムネット計算サーバ システム A として HPE Superdome Flex(総 CPU コア数 1,152)、ゲノムネット計算サーバ システム B および化学計算サーバとして HPE Apollo 2000(総 CPU コア数 5,680)、ゲノムネット公開サーバとゲノムネット開発サーバとして HPE ProLiant DL560(総 CPU コア数 640)を採用しました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<https://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、令和元年度の 381 名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、82 件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、令和元年度は 10 件の採択課題（バイオ情報学分野）推進に利用されました。

今後とも、スーパーコンピュータシステムをより良いものにしていくために、皆さまのご意見やご要望を以下のメールアドレスまでお寄せくださいますようお願い申し上げます。

送付先メールアドレス : spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

2020 年 3 月

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター
<https://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>
スーパーコンピュータシステム
<https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

化学研究所

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	時任 宣博	1
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	水畑 吉行	2
完璧な π 共役二次元シートを持つフラットシリセンの設計	高橋 まさえ	3
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	4
軸性不斉DMAP型触媒の開発と絶対配置の推定	上田 善弘	5
リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの創製	榊原 圭太	6
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察	登阪 雅聡	7
含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	8
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	9
界面の振動分光学	長谷川 健	10
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	11
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成	中村 正治	12
機能性高分子合成を指向した遷移金属錯体触媒の開発	脇岡 正幸	13
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	14
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発	田村 武幸	15
化学生命科学研究領域の研究報告	緒方 博之	16
海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究	遠藤 寿	18
ウイルスの多様化と生物進化の関係の解明	吉川 元貴	20
腸内微生物群集が炎症性腸疾患に及ぼす影響の解明	西山 拓輝	21
浦ノ内湾におけるブルーム形成植物プランクトンとメガウイルス科の群集季節変動の解析	Prodinger Florian	22
海洋微生物生態系における種間相互作用の研究	金子 博人	23
巨大ウイルスの分離と比較ゲノム解析	吉田 亘騎	24
パルマ藻・珪藻の比較ゲノム解析	伴 広輝	25
メタゲノムを利用したNCLDVの新規補助代謝遺伝子の探索	宮崎 うらら	26
バイオインフォマティクス実習	チョウ ルイシヤン	27
赤潮期間中囲まれた湾でメタバーコーディングを使って二つのメガウイルス科群集の比較	夏 駿	28

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素材料の理論的研究	小島 崇寛	29
--------------	-------	------	----

防災研究所

SSEに伴う海面地殻変動の推定	井上 智裕	30
-----------------	-------	------	----

理学研究科

環状ピロール-イミダゾールポリアミドの合成と評価	廣瀬 優希	31
量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析	野田 泰斗	32
ヘテロ環化合物の再構築反応開発	野木 馨介	33

工学研究科

エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価	内藤 悠太	34
近赤外円偏光発光材料の創出	三木 康嗣	35
有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成	岡本 和紘	36
層状アンチモン化合物の構造シミュレーション	新井 一功	37
可視光応答型光触媒を用いる高効率水分解システムの開発	鈴木 肇	38
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平	39
有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価	筒井 祐介	40
13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明	伊藤 峻一郎	41
HOPG基板上における分子配列のモデリング	松田 建児	42
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	43
ポリエチレングリコールで修飾したピリジン配位子の開発	藤原 哲晶	44
計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測	松本 充弘	45
琵琶湖水中におけるウイルスメタゲノム解析	沈 尚	46

エネルギー科学研究科

エネルギー機能材料の電子構造と光物性	蜂谷 寛	47
生体系物質の原子・電子解析	馬淵 守	48
材料界面・表面の原子～電子論的研究	楠田 啓	49
金属材料の表面特性	袴田 昌高	50
金属表面の物性解析	陳 友晴	51

農学研究科

磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発	久住 亮介	52
一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究	吉田 天士	53
効率的な有用物質生産に向けた真核微細藻類のゲノム解析	澤山 茂樹	54
量子化学計算によるリグニンモデル化合物の間接電解反応機構の解析	平野 義貴	55

人間・環境学研究科

三次元 π 共役分子の合成の機能性の創出	廣戸 聡	56
ガラス長残光蛍光体における残光メカニズムの解明	上田 純平	57
有機分子性結晶の気体吸着特性の解析	津江 広人	58

高等研究院

金属錯体ソフトマテリアルの創成	古川 修平	59
水素貯蔵を示す水素化物含有金属-有機構造体の合成	堀毛 悟史	60
自己集合を利用したタンパク質のカプセル化	藤田 大士	61
多能性細孔物質の深化	大竹 研一	62

福井謙一記念研究センター

振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	64
-----------------	------	-------	----

産官学連携本部

固液界面を反応場とする化学反応	湊 丈俊	65
電池材料のラマンスペクトルの計算	山中 俊朗	67

京都大学以外

生体分子情報データベースの開発とその応用	五斗 進	68
遺伝子情報を用いた海洋生態学研究	西村 陽介	69
グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用	松井 求	70
ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析	上田 敦史	71
MAGsによる、腸内細菌叢比較ゲノム解析	中村 祐哉	72
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也	73
カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイド生合成パスウェイの再構築	藪崎 純子	74
密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索	蒲池 高志	76
湖沼に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析	岡崎 友輔	77
高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅	Carles Serrat	78
スギゲノムの解読と解析	藤野 健	79
タンパク質の電子状態計算	平野 敏行	80
アミノアシルtRNA合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源	浜口 悠貴	81
機能性高分子材料の創生	三田 文雄	82
計算化学を活用した天然物の合成研究	占部 大介	83
液々界面での電子移動反応の研究	平野 智倫	84

生態学的ビッグデータを用いた生物多様性の創出・維持機構の研究	久保田 康裕	85
高分子－低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響	武智 恭世	86
ゼロ金利制約のあるDSGEモデルのパラメータ推定	砂川 武貴	87

スーパーコンピュータシステム

システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也	88
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	94
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	95
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴	福本 淳司	130
令和元年度研究課題一覧		136

京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

<https://www.scl.kyoto-u.ac.jp>